

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

Scuola di Scienze
Dipartimento di Fisica e Astronomia
Corso di Laurea in Fisica

Applicazioni del metodo variazionale ad alcuni problemi di fisica atomica e nucleare

Relatore:
Prof. Roberto Zucchini

Presentata da:
Gianluca D'Emilio

Anno Accademico 2016/2017

Sommario

Utilizzando il metodo variazionale si studiano alcuni sistemi con l'obiettivo di approssimare l'energia del loro stato fondamentale. I casi trattati in questa tesi vertono su problemi di natura atomica, quali la descrizione degli atomi di idrogeno, elio e dell'atomo muonico, e su problemi di carattere nucleare, quali la stima dell'ampiezza del potenziale di Yukawa e la descrizione del deutone.

Indice

Introduzione	2
1 Metodo Variazionale	3
2 Applicazioni del metodo variazionale	7
2.1 Valor medio dell'energia	7
2.2 Applicazione elementare: atomo idrogenoide	8
2.3 Atomo di elio	11
2.4 Atomo muonico	15
2.5 Potenziale di Yukawa	20
2.6 Modello a forza centrale del deutone	23
A Funzione Gamma di Eulero	26
Bibliografia	27

Introduzione

In meccanica quantistica il problema principale che si intende risolvere per descrivere un sistema è il problema agli autovalori dell'Hamiltoniana di tale sistema. Quando è possibile decomporre l'Hamiltoniana nella somma di un termine imperturbato, di cui si conosce la soluzione esatta, e di una perturbazione, la cui scala di energia caratteristica è piccola rispetto a quella del termine imperturbato, risulta efficace la teoria perturbativa. Tuttavia non sempre è possibile adottare questo approccio. Per sistemi a forte interazione, come atomi multielettronici, molecole, nuclei atomici o solidi cristallini, per i quali la teoria perturbativa non restituisce risultati soddisfacenti, si applica il *metodo variazionale*, utile per descrivere lo stato fondamentale, di energia più bassa, ma meno affidabile nel caso di stati eccitati.

Il metodo variazionale consiste nel costruire un *ket di prova*, dipendente da uno o più parametri, e calcolare l'energia media del sistema posto nello stato di prova. Minimizzando tale energia rispetto ai parametri scelti, si ha un'approssimazione dell'energia effettiva del sistema nello stato fondamentale, nonché del suo ket rappresentativo. L'efficacia di questo metodo dipende dalla scelta di ket appropriati, che rendano conto delle proprietà del sistema.

Il primo sistema analizzato è l'atomo idrogenoide del quale, poiché si conosce a priori l'autofunzione dello stato fondamentale, si riesce a dare una descrizione esatta. Si studiano poi gli stati fondamentali dell'atomo di elio e dell'atomo muonico, che risentono di effetti di carattere elettrostatico aggiuntivi, non presenti nell'atomo idrogenoide. Infine, si analizza il potenziale di Yukawa e lo si utilizza per descrivere il deutone tramite un modello a forza centrale.

Capitolo 1

Metodo Variazionale

Il *metodo variazionale* richiede di costruire un funzionale definito sullo spazio di Hilbert del ket del sistema, tale che i suoi ket critici siano soluzioni del problema agli autovalori dell'Hamiltoniana del sistema. Il funzionale in questione risulta essere

$$\mathcal{E}[\phi] = \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}, \quad (1.1)$$

detto *funzionale d'energia*, definito per qualsiasi ket non nullo, non necessariamente normalizzato. A livello fisico non è altro che l'energia media del sistema nello stato $|\phi\rangle / \sqrt{\langle \phi | \phi \rangle}$.

Quando la variazione prima del funzionale d'energia è nulla per un ket $|\bar{\phi}\rangle$ non nullo

$$\delta \mathcal{E}[\bar{\phi}] = 0, \quad (1.2)$$

tale ket viene detto *ket critico* di $\mathcal{E}[\phi]$. Tale condizione è verificata quando $|\bar{\phi}\rangle$ soddisfa l'equazione non lineare

$$\hat{H}|\phi\rangle - |\phi\rangle \mathcal{E}[\phi] = 0. \quad (1.3)$$

Dimostrazione. Calcolando la variazione di $\mathcal{E}[\phi]$ in (1.1) per una variazione infinitesima $|\delta\phi\rangle$ di $|\phi\rangle$ si ottiene

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{E}[\phi] &= \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \left(\langle \delta\phi | \hat{H} | \phi \rangle + \langle \phi | \hat{H} | \delta\phi \rangle \right) - \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle^2} (\langle \delta\phi | \phi \rangle + \langle \phi | \delta\phi \rangle) \\ &= \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \left[\langle \delta\phi | \left(\hat{H} | \phi \rangle - | \phi \rangle \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \right) + \left(\langle \phi | \hat{H} - \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \langle \phi | \right) | \delta\phi \rangle \right] \\ &= \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \left[\langle \delta\phi | \left(\hat{H} | \phi \rangle - | \phi \rangle \mathcal{E}[\phi] \right) + \left(\langle \phi | \hat{H} - \mathcal{E}[\phi] \langle \phi | \right) | \delta\phi \rangle \right]. \end{aligned}$$

Si ha quindi che

$$\delta \mathcal{E}[\phi] = \frac{2}{\langle \phi | \phi \rangle} \text{Re} \left[\langle \delta\phi | \left(\hat{H} | \phi \rangle - | \phi \rangle \mathcal{E}[\phi] \right) \right]. \quad (1.4)$$

Imponendo $\delta\mathcal{E}[\phi] = 0$ per un ket $|\delta\phi\rangle$ arbitrario, da (1.4) segue che

$$\text{Re} \left[\langle \delta\phi | \left(\hat{H}|\phi\rangle - |\phi\rangle \mathcal{E}[\phi] \right) \right] = 0.$$

Dato che il ket $|\delta\phi\rangle$ è arbitrario, si può ripetere lo stesso procedimento utilizzando il ket $|\delta\phi\rangle i$, ottenendo

$$\text{Im} \left[\langle \delta\phi | \left(\hat{H}|\phi\rangle - |\phi\rangle \mathcal{E}[\phi] \right) \right] = 0.$$

Combinando gli ultimi due risultati ottenuti, data l'arbitrarietà di $|\delta\phi\rangle$, segue l'equazione (1.3). \square

Dall'equazione (1.3) si dimostra che un ket $|\bar{\phi}\rangle$ è *autoket* di \hat{H} se e solo se è un ket critico di $\mathcal{E}[\phi]$.

Dimostrazione. Sia $|\bar{\phi}\rangle$ un ket critico di $\mathcal{E}[\phi]$, che quindi è soluzione di (1.3). Ponendo

$$w = \mathcal{E}[\bar{\phi}]$$

l'equazione (1.3) diventa

$$\hat{H}|\bar{\phi}\rangle - |\bar{\phi}\rangle w = 0.$$

Risulta quindi che $|\bar{\phi}\rangle$ è un autoket di \hat{H} relativo all'autovalore w .

Sia invece $|\bar{\phi}\rangle$ un autoket di \hat{H} con autovalore w . Utilizzando la relazione agli autovalori

$$\hat{H}|\bar{\phi}\rangle = |\bar{\phi}\rangle w \tag{1.5}$$

vediamo che

$$\mathcal{E}[\bar{\phi}] = \frac{\langle \bar{\phi} | \hat{H} | \bar{\phi} \rangle}{\langle \bar{\phi} | \bar{\phi} \rangle} = \frac{\langle \bar{\phi} | |\bar{\phi}\rangle w}{\langle \bar{\phi} | \bar{\phi} \rangle} w = w.$$

Si nota quindi che la (1.5) equivale alla (1.3) di cui $|\bar{\phi}\rangle$ è soluzione, ed risulta perciò un ket critico di $\mathcal{E}[\phi]$. \square

La teoria variazionale offre quindi un metodo di calcolo alternativo ed equivalente al problema agli autovalori di \hat{H} , che consiste nel trovare i ket critici del funzionale $\mathcal{E}[\phi]$. Tale procedura, tuttavia, spesso non è più semplice del problema agli autovalori iniziale. Si tenta quindi di utilizzare ket di prova, che approssimino bene i ket critici e per i quali il valore del funzionale d'energia sia prossimo all'autovalore dell'energia di \hat{H} . La seguente considerazione sul funzionale d'energia sarà utile nella ricerca di buone approssimazioni di ket critici.

I ket critici di $\mathcal{E}[\phi]$ corrispondono a punti estremanti di $\mathcal{E}[\phi]$ nello spazio dei ket, come evidenzia (1.2). Un ket critico $|\bar{\phi}\rangle$ minimizza $\mathcal{E}[\phi]$ se la sua *seconda variazione* in $|\bar{\phi}\rangle$ è *definita non negativa*,

$$\delta^2 \mathcal{E}[\bar{\phi}] \geq 0. \tag{1.6}$$

Tale condizione risulta verificata quando $|\bar{\phi}\rangle$ è un autoket di \hat{H} relativo al *minimo autovalore dell'energia* w_0 .

Dimostrazione. Si calcola la variazione seconda di $\mathcal{E}[\phi]$ per una variazione infinitesima $|\delta\phi\rangle$ di ϕ , variando (1.4),

$$\begin{aligned}
\delta^2\mathcal{E}[\phi] &= -2 \frac{\langle\delta\phi|\phi\rangle + \langle\phi|\delta\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle^2} \operatorname{Re}\left[\langle\delta\phi|\left(\hat{H}|\phi\rangle - |\phi\rangle\mathcal{E}[\phi]\right)\right] \\
&\quad + \frac{2}{\langle\phi|\phi\rangle} \operatorname{Re}\left[\langle\delta\phi|\left(\hat{H}|\delta\phi\rangle - |\delta\phi\rangle\mathcal{E}[\phi] - |\phi\rangle\delta\mathcal{E}[\phi]\right)\right] \\
&= -2 \frac{\operatorname{Re}(\langle\delta\phi|\phi\rangle)}{\langle\phi|\phi\rangle} \underbrace{\frac{2}{\langle\phi|\phi\rangle} \operatorname{Re}\left[\langle\delta\phi|\left(\hat{H}|\phi\rangle - |\phi\rangle\mathcal{E}[\phi]\right)\right]}_{\delta\mathcal{E}[\phi]} \\
&\quad - 2 \frac{\operatorname{Re}(\langle\delta\phi|\phi\rangle)}{\langle\phi|\phi\rangle} \delta\mathcal{E}[\phi] + \frac{2}{\langle\phi|\phi\rangle} \operatorname{Re}\left[\langle\delta\phi|\left(\hat{H}|\delta\phi\rangle - |\delta\phi\rangle\mathcal{E}[\phi]\right)\right] \\
&= \frac{2}{\langle\phi|\phi\rangle} \left(\langle\delta\phi|\hat{H}|\delta\phi\rangle - \langle\delta\phi|\delta\phi\rangle\mathcal{E}[\phi] \right) - 4 \frac{\operatorname{Re}(\langle\delta\phi|\phi\rangle)}{\langle\phi|\phi\rangle} \delta\mathcal{E}[\phi].
\end{aligned}$$

Si è sfruttato il fatto che $\langle\delta\phi|\delta\phi\rangle$ essendo il modulo quadro di $|\delta\phi\rangle$ è un numero reale, così come, dato che $\hat{H} = \hat{H}^+$, è reale $\langle\delta\phi|\hat{H}|\delta\phi\rangle = \langle\delta\phi|\hat{H}^+|\delta\phi\rangle$.

Se si considera la variazione nel ket critico $|\bar{\phi}\rangle$, segue da (1.2) che

$$\delta^2\mathcal{E}[\bar{\phi}] = \frac{2}{\langle\bar{\phi}|\bar{\phi}\rangle} \left(\langle\delta\phi|\hat{H}|\delta\phi\rangle - \langle\delta\phi|\delta\phi\rangle\mathcal{E}[\bar{\phi}] \right)$$

Essendo $|\bar{\phi}\rangle$ un autoket di \hat{H} , in quanto ket critico, supponiamo che appartenga al minimo autovalore dell'energia w_0 di \hat{H} . Essendo quindi $\mathcal{E}[\bar{\phi}] = w_0$, si ha che

$$\delta^2\mathcal{E}[\bar{\phi}] = \frac{2}{\langle\bar{\phi}|\bar{\phi}\rangle} \left(\langle\delta\phi|\hat{H}|\delta\phi\rangle - \langle\delta\phi|\delta\phi\rangle w_0 \right). \quad (1.7)$$

Si consideri una base ortonormale dello spazio dei ket, formata da autoket di \hat{H} , parametrizzata da un set discreto di numeri quantici n , così che

$$\hat{H}|n\rangle = |n\rangle w_n. \quad (1.8)$$

Si ha che

$$\langle n' | n \rangle = \delta_{n',n}, \quad (1.9)$$

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}. \quad (1.10)$$

Utilizzando (1.8) e (1.10) si ottiene l'espansione spettrale di \hat{H} ,

$$\hat{H} = \sum_n |n\rangle w_n \langle n|. \quad (1.11)$$

Considerando il risultato ottenuto in (1.7) ed utilizzando (1.10) e (1.11) risulta che

$$\begin{aligned}\langle \delta\phi | \hat{H} | \delta\phi \rangle - \langle \delta\phi | \delta\phi \rangle w_0 &= \langle \delta\phi | \sum_n |n\rangle w_n \langle n| \delta\phi \rangle - \langle \delta\phi | \sum_n |n\rangle \langle n| \delta\phi \rangle w_0 \\ &= \sum_n |\langle \delta\phi | n \rangle|^2 (w_n - w_0) \geq 0\end{aligned}$$

dato che w_0 è il minimo autovalore di \hat{H} . Sfruttando in (1.7) il risultato appena ottenuto è verificata la (1.6). \square

Da questa considerazione si riescono a ottenere buone approssimazioni dei ket critici dello stato di minima energia. Poiché l'energia di uno stato di prova qualsiasi è sempre maggiore di quella effettiva, minimizzando l'energia di un ket di prova che dipenda da un set di uno o più parametri, si ottiene la miglior stima possibile dello stato a minima energia. I ket di prova da utilizzare dipendono dal problema specifico trattato e derivano da considerazioni qualitative delle proprietà fisiche del sistema. Migliore la scelta del ket di prova e dei parametri da cui dipende, migliore la descrizione dello stato del sistema.

Il metodo consiste nello scegliere un ket di prova $|\phi(\alpha)\rangle$ dipendente da uno o più parametri α_i e considerare il funzionale d'energia come una funzione ordinaria nelle variabili α_i

$$f(\alpha) = \mathcal{E}[\phi(\alpha)].$$

Derivando $f(\alpha)$ rispetto ai vari parametri e ponendo tale derivata uguale a 0

$$\frac{\partial f(\alpha)}{\partial \alpha_i} = 0$$

si ottengono vari set di soluzioni $\bar{\alpha}$, di cui si conservano quelli che restituiscono il valore minimo di $f(\alpha)$, formando una sottovarietà di soluzioni $\bar{\alpha}^0$. A questo punto $f(\bar{\alpha}^0)$ è il valore approssimato del minimo autovalore dell'energia w_0 e i ket $|\phi(\bar{\alpha}^0)\rangle$ sono gli autoket di w_0 approssimati. La presenza di più soluzioni e l'indipendenza lineare dei vari $|\phi(\bar{\alpha}^0)\rangle$ indicano la degenerazione di w_0 .

Capitolo 2

Applicazioni del metodo variazionale

2.1 Valor medio dell'energia

In questa sezione si dimostra che per un qualunque sistema con componente angolare nulla, soggetto a un campo centrale $U(r)$, l'energia media è esprimibile come

$$\langle \hat{H} \rangle = E_{kin} + E_{pot}, \quad (2.1)$$

in cui

$$E_{kin} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \left(\frac{d\chi(r)}{dr} \right)^2 dr, \quad (2.2)$$

$$E_{pot} = \int_0^\infty U(r) \chi(r)^2 dr. \quad (2.3)$$

La funzione $\chi(r)$ si ottiene dalla funzione d'onda del sistema $\phi(r)$

$$\langle \mathbf{x} | \phi(r) \rangle = \phi(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\chi(r)}{r} \implies \chi(r) = \sqrt{4\pi} r \phi(r), \quad (2.4)$$

in cui il termine $\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ non è altro che l'armonica sferica $Y_{0,0}$.

Dimostrazione. Prima di calcolare $\langle \hat{H} \rangle$, si calcola

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | \hat{H} | \phi(r) \rangle &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right] \langle \mathbf{x} | \phi(r) \rangle = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \phi(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \phi(r)}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \phi(r)}{\partial \theta} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \phi(r)}{\partial \varphi^2} \right] + U(r) \phi(r) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\hbar^2}{2\sqrt{4\pi}m} \left[\frac{d^2}{dr^2} \left(\frac{\chi}{r} \right) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \left(\frac{\chi}{r} \right) \right] + \frac{U(r)}{\sqrt{4\pi}} \frac{\chi}{r} = \\
&= -\frac{\hbar^2}{2\sqrt{4\pi}m} \left(\frac{2\chi}{r^3} - \frac{2}{r^2} \frac{d\chi}{dr} + \frac{1}{r} \frac{d^2\chi}{dr^2} - \frac{2\chi}{r^3} + \frac{2}{r^2} \frac{d\chi}{dr} \right) + \frac{U(r)}{\sqrt{4\pi}} \frac{\chi}{r} = \\
&= \frac{1}{\sqrt{4\pi}r} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dr^2} + U(r)\chi \right).
\end{aligned}$$

Ora, calcolando $\langle \hat{H} \rangle$ si ottiene che

$$\begin{aligned}
\langle \hat{H} \rangle &= \langle \phi(r) | \hat{H} | \phi(r) \rangle = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \phi^*(r) H \phi(r) r^2 \sin \theta d\varphi d\theta dr = \\
&= 4\pi \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\chi}{r} \frac{1}{\sqrt{4\pi}r} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dr^2} + U(r)\chi \right) r^2 dr = \\
&= \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \frac{d^2\chi}{dr^2} \chi dr}_{E_{kin}} + \underbrace{\int_0^\infty U(r)\chi^2 dr}_{E_{pot}}.
\end{aligned}$$

Il termine di energia potenziale (2.3) risulta dal calcolo precedente. Considerando poi che la funzione $\chi(r)$ deve necessariamente annullarsi in $r = 0$ e $r \rightarrow \infty$ affinché la funzione d'onda (2.4) sia normalizzabile, integrando per parti il risultato appena ottenuto si ha

$$\begin{aligned}
E_{kin} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \frac{d^2\chi}{dr^2} \chi dr = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\chi}{dr} \chi \Big|_0^\infty - \int_0^\infty \frac{d\chi}{dr} \frac{d\chi}{dr} dr \right) \\
&= \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \left(\frac{d\chi}{dr} \right)^2 dr,
\end{aligned}$$

che dimostra (2.2). □

2.2 Applicazione elementare: atomo idrogenoide

L'applicazione più semplice del metodo variazionale è il calcolo dell'autofunzione e dell'autovalore dell'energia dello stato fondamentale di un atomo idrogenoide, da cui si nota come scegliendo la funzione d'onda adeguata si possa giungere anche ad una descrizione esatta del sistema.

L'energia dello stato fondamentale è

$$w_0 = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}, \quad (2.5)$$

dove è stato posto $\varepsilon_0 = \frac{1}{4\pi}$. Inoltre, lo stato fondamentale $|1, 0, 0\rangle$ è non degenere ed ha funzione d'onda

$$\langle \mathbf{x} | 1, 0, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{r_B} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{Zr}{r_B} \right), \quad (2.6)$$

dove $r_B = \hbar^2/me^2$ è il raggio di Bohr.

Supponendo di non conoscere l'energia e l'autofunzione dello stato fondamentale, si può costruire un ket di prova considerando che l'autofunzione debba avere simmetria sferica e un decadimento esponenziale al crescere della distanza dal nucleo. Utilizzando il ket $|\phi(\alpha)\rangle$ con funzione d'onda

$$\langle \mathbf{x} | \phi(\alpha) \rangle = \phi(\alpha) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r}, \quad (2.7)$$

si calcola il funzionale d'energia (1.1) che, data la normalizzazione a 1 di $|\phi(\alpha)\rangle$, non è altro che l'energia media del sistema nello stato $|\phi(\alpha)\rangle$

$$\mathcal{E}[\phi(\alpha)] = \langle \phi(\alpha) | \hat{H} | \phi(\alpha) \rangle = \langle \hat{H} \rangle. \quad (2.8)$$

Dimostrazione. Operando un cambio di variabile $x = 2\alpha r$ nell'integrale e utilizzando la funzione Gamma (A.1), si calcola

$$\begin{aligned} \langle \phi(\alpha) | \phi(\alpha) \rangle &= \int |\phi(\alpha)|^2 d\mathbf{x}^3 = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-2\alpha r} r^2 \sin \theta d\varphi d\theta dr \\ &= 4\pi \frac{\alpha^3}{\pi} \int_0^\infty \frac{x^2}{4\alpha^2} e^{-x} \frac{dx}{2\alpha} = \frac{\Gamma(3)}{2} = 1. \end{aligned}$$

Per la normalizzazione a 1 di $|\phi(\alpha)\rangle$ vale (2.8). □

Per calcolare (2.8) si utilizzano le formule (2.1), (2.2) e (2.3)

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle &= E = E_{kin} + E_{pot}, \\ E_{kin} &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \left(\frac{d\chi}{dr} \right)^2 dr, \\ E_{pot} &= \int_0^\infty U_C(r) \chi^2 dr, \end{aligned}$$

dove $U_C(r)$ è il potenziale coulombiano dovuto alla carica del nucleo

$$U_C(r) = -\frac{Ze^2}{r},$$

mentre χ si vale

$$\chi = 2\alpha^{3/2} r e^{-\alpha r}.$$

Utilizzando la funzione Gamma e il cambio di variabile di integrazione $x = 2\alpha r$, si calcolano E_{kin}

$$\begin{aligned} E_{kin} &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \left(\frac{d\chi}{dr} \right)^2 dr = \frac{2\hbar^2\alpha^3}{m} \int_0^\infty (e^{-\alpha r} - \alpha r e^{-\alpha r})^2 dr \\ &= \frac{2\hbar^2\alpha^3}{m} \int_0^\infty (1 + \alpha^2 r^2 - 2\alpha r) e^{-2\alpha r} dr \\ &= \frac{2\hbar^2\alpha^3}{m} \int_0^\infty \left(1 + \frac{x^2}{4} - x \right) e^{-x} \frac{dx}{2\alpha} \\ &= \frac{\hbar^2\alpha^2}{m} \left(\Gamma(1) + \frac{\Gamma(3)}{4} - \Gamma(2) \right) = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}, \end{aligned}$$

ed E_{pot}

$$\begin{aligned} E_{pot} &= \int_0^\infty U_C(r) \chi^2 dr = -4\alpha^3 Z e^2 \int_0^\infty \frac{1}{r} r^2 e^{-2\alpha r} dr \\ &= -4\alpha^3 Z e^2 \int_0^\infty \frac{x}{2\alpha} e^{-x} \frac{dx}{2\alpha} = -\alpha Z e^2 \Gamma(2) = -\alpha Z e^2. \end{aligned}$$

Il valor medio dell'energia è quindi

$$\langle \hat{H} \rangle = E_{kin} + E_{pot} = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} - \alpha Z e^2.$$

Si applica ora il metodo variazionale derivando $\mathcal{E}[\phi(\alpha)] = \langle \hat{H} \rangle$ e ponendo la derivata uguale a zero

$$\frac{d\mathcal{E}[\phi(\alpha)]}{d\alpha} = \frac{\hbar^2\alpha}{m} - Z e^2 = 0,$$

da cui si ricava che il valore ottimale del parametro α è

$$\bar{\alpha} = \frac{m Z e^2}{\hbar^2} = \frac{Z}{r_B}.$$

Calcolando $\mathcal{E}[\phi(\bar{\alpha})]$ si vede che la stima ottenuta con il metodo variazionale coincide con il valore vero (2.5)

$$\mathcal{E}[\phi(\bar{\alpha})] = \frac{\hbar^2\bar{\alpha}^2}{2m} - \bar{\alpha} Z e^2 = -\frac{m Z^2 e^4}{2\hbar^2} = w_0.$$

Ponendo poi $\alpha = \bar{\alpha}$ in (2.7) si ha

$$\phi(\bar{\alpha}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{r_B} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{Zr}{r_B} \right)$$

che coincide con la funzione d'onda esatta (2.6).

2.3 Atomo di elio

Si considera ora il caso di un atomo con nucleo di carica Ze^2 e due soli elettroni nello stato $1s$. In tale sistema non vi è solo l'interazione elettromagnetica attrattiva tra nucleo ed elettrone, ma è presente anche un'interazione elettromagnetica di tipo repulsivo tra i due elettroni. L'Hamiltoniana del sistema è

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \quad (2.9)$$

in cui μ è la massa ridotta degli elettroni, r_1 e r_2 sono le distanze dal nucleo dei due elettroni e r_{12} è la distanza reciproca tra i due elettroni. L'autofunzione di prova che si utilizza è data dal prodotto di due autofunzioni idrogenoidi (2.6),

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \phi \rangle = \phi(r_1, r_2) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{\tilde{Z}}{r_B} \right)^3 e^{-\frac{\tilde{Z}}{r_B}(r_1+r_2)}, \quad (2.10)$$

in cui si è sostituito il numero atomico Z con un numero atomico efficace $\tilde{Z} = Z - \sigma$, che tiene conto dell'effetto di schermo sulla carica nucleare, dovuto alla repulsione reciproca degli elettroni. Il parametro σ è quello che funge da schermo per la carica nucleare Z , ed è anche il parametro variazionale che si utilizza per stimare l'energia.

Si mostra che la funzione d'onda scelta è già normalizzata calcolando

$$\begin{aligned} \langle \phi | \phi \rangle &= \int d\mathbf{x}_1^3 \int d\mathbf{x}_2^3 |\phi(r_1, r_2)|^2 = \\ &= \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{\tilde{Z}}{r_B} \right)^6 \int_0^\infty dr_1 4\pi r_1^2 e^{-\frac{2\tilde{Z}}{r_B}r_1} \int_0^\infty dr_2 4\pi r_2^2 e^{-\frac{2\tilde{Z}}{r_B}r_2} = \\ &= 16 \left(\frac{\tilde{Z}}{r_B} \right)^6 \int_0^\infty dx_1 \left(\frac{r_B}{2\tilde{Z}} \right)^3 x_1^2 e^{-x_1} \int_0^\infty dx_2 \left(\frac{r_B}{2\tilde{Z}} \right)^3 x_2^2 e^{-x_2} = \\ &= \frac{1}{4} \Gamma(3)^2 = 1, \end{aligned}$$

in cui si è sfruttato il cambio di variabile $x_i = \frac{2\tilde{Z}}{r_B}r_i$ nell'integrale. Si può quindi calcolare (1.1), data l'Hamiltoniana (2.9), come

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\phi] = \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle &= \langle \phi | -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_1^2 - \frac{\tilde{Z}e^2}{r_1} | \phi \rangle + \langle \phi | -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_2^2 - \frac{\tilde{Z}e^2}{r_2} | \phi \rangle \\ &\quad - \sigma e^2 \langle \phi | \frac{1}{r_1} | \phi \rangle - \sigma e^2 \langle \phi | \frac{1}{r_2} | \phi \rangle + e^2 \langle \phi | \frac{1}{r_{12}} | \phi \rangle. \end{aligned} \quad (2.11)$$

I primi due termini corrispondono ciascuno all'energia media del ground state di un atomo idrogenoide di numero atomico \tilde{Z} , ed hanno perciò un'energia del tipo (2.5),

$$\langle \phi | -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{\tilde{Z}e^2}{r} | \phi \rangle = -\frac{\mu \tilde{Z}^2 e^4}{2\hbar^2}.$$

Terzo e quarto termine sono uguali, e il loro contributo si trova calcolando

$$\begin{aligned} \langle \phi | \frac{1}{r_1} | \phi \rangle &= \int d\mathbf{x}_1^3 \int d\mathbf{x}_2^3 \frac{|\phi(r_1, r_2)|^2}{r_1} = \\ &= \int_0^\infty dr_1 4\pi r_1^2 \frac{1}{r_1} \int_0^\infty dr_2 4\pi r_2^2 \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{\tilde{Z}}{r_B} \right)^6 e^{-\frac{2\tilde{Z}}{r_B}(r_1+r_2)} = \\ &= 16 \left(\frac{\tilde{Z}}{r_B} \right)^6 \int_0^\infty dr_1 r_1 e^{-\frac{2\tilde{Z}}{r_B}r_1} \int_0^\infty dr_2 r_2^2 e^{-\frac{2\tilde{Z}}{r_B}r_2} = \\ &= 16 \left(\frac{\tilde{Z}}{r_B} \right)^6 \int_0^\infty dx_1 \left(\frac{r_B}{2\tilde{Z}} \right)^2 x_1 e^{-x_1} \int_0^\infty dx_2 \left(\frac{r_B}{2\tilde{Z}} \right)^3 x_2^2 e^{-x_2} \\ &= \frac{\tilde{Z}}{2r_B} \Gamma(2)\Gamma(3) = \frac{\tilde{Z}}{r_B} = \frac{\mu \tilde{Z} e^2}{\hbar^2}. \end{aligned}$$

L'ultimo termine di (2.11) si può calcolare espandendo r_{12} in polinomi di Legendre

$$\frac{1}{r_{12}} = \begin{cases} \frac{1}{r_1} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r_2}{r_1} \right)^l P_l(\cos \alpha_{12}) & \text{per } r_2 < r_1 \\ \frac{1}{r_2} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r_1}{r_2} \right)^l P_l(\cos \alpha_{12}) & \text{per } r_1 < r_2 \end{cases},$$

in cui α_{12} indica l'angolo compreso tra i vettori \mathbf{r}_1 e \mathbf{r}_2 ,

$$\begin{aligned} \langle \phi | \frac{1}{r_{12}} | \phi \rangle &= \int d\mathbf{x}_1^3 \int d\mathbf{x}_2^3 \frac{|\phi(r_1, r_2)|^2}{r_{12}} = \\ &= \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \int d\Omega_1 \\ &\quad \left[\int_0^{r_1} dr_2 r_2^2 |\phi(r_1, r_2)|^2 \int d\Omega_2 \frac{1}{r_1} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r_2}{r_1} \right)^l P_l(\cos \alpha_{12}) \right. \\ &\quad \left. + \int_{r_1}^\infty dr_2 r_2^2 |\phi(r_1, r_2)|^2 \int d\Omega_2 \frac{1}{r_2} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r_2}{r_1} \right)^l P_l(\cos \alpha_{12}) \right]. \end{aligned}$$

Si espandono ora i polinomi di Legendre in armoniche sferiche, usando

$$P_l(\alpha_{12}) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{l,m}(\Omega_1) Y_{l,m}^*(\Omega_2),$$

ed essendo l'armonica sferica $Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ una costante, si riscrive (2.10) come

$$\phi(r_1, r_2) = 4 Y_{0,0}(\Omega_1) Y_{0,0}(\Omega_2) \left(\frac{\tilde{Z}}{r_B} \right)^3 e^{-\frac{\tilde{Z}}{r_B}(r_1+r_2)}.$$

Si ha quindi

$$\begin{aligned} & 16 \left(\frac{\tilde{Z}}{r_B} \right)^6 \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \int d\Omega_1 \\ & \left[\frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} dr_2 r_2^2 e^{-\frac{2\tilde{Z}}{r_B}(r_1+r_2)} \frac{Y_{0,0}(\Omega_1)}{\sqrt{4\pi}} \frac{Y_{0,0}(\Omega_2)}{\sqrt{4\pi}} \right. \\ & \quad \int d\Omega_2 \sum_{l=0}^\infty \left(\frac{r_2}{r_1} \right)^l \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{l,m}(\Omega_1) Y_{l,m}^*(\Omega_2) \\ & \quad + \int_{r_1}^\infty dr_2 r_2 e^{-\frac{2\tilde{Z}}{r_B}(r_1+r_2)} \frac{Y_{0,0}(\Omega_1)}{\sqrt{4\pi}} \frac{Y_{0,0}(\Omega_2)}{\sqrt{4\pi}} \\ & \quad \left. \int d\Omega_2 \sum_{l=0}^\infty \left(\frac{r_2}{r_1} \right)^l \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{l,m}(\Omega_1) Y_{l,m}^*(\Omega_2) \right]. \end{aligned}$$

Poiché le armoniche sferiche rispettano la relazione di ortonormalità

$$\int d\Omega Y_{l,m}(\Omega) Y_{l',m'}^*(\Omega) = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'},$$

integrando rispetto all'angolo solido $d\Omega_2$, $l = 0$ e $m = 0$ risultano gli unici indici rilevanti per il calcolo, e si ha

$$\begin{aligned} & = 16 \left(\frac{\tilde{Z}}{r_B} \right)^6 \int_0^\infty dr_1 4\pi r_1^2 e^{-\frac{2\tilde{Z}}{r_B}r_1} \left[\frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} dr_2 Y_{0,0}(\Omega_1)^2 r_2^2 e^{-\frac{2\tilde{Z}}{r_B}r_2} \right. \\ & \quad \left. + \int_{r_1}^\infty dr_2 Y_{0,0}(\Omega_1)^2 r_2 e^{-\frac{2\tilde{Z}}{r_B}r_2} \right] = \\ & = \frac{1}{4} \left(\frac{2\tilde{Z}}{r_B} \right)^6 \int_0^\infty dr_1 r_1^2 e^{-\frac{2\tilde{Z}}{r_B}r_1} \left[\frac{1}{r_1} \left(\frac{r_B}{2\tilde{Z}} \right)^3 \int_0^{\frac{2\tilde{Z}}{r_B}r_1} dx x^2 e^{-x} + \left(\frac{r_B}{2\tilde{Z}} \right)^2 \int_{\frac{2\tilde{Z}}{r_B}r_1}^\infty dx x e^{-x} \right]. \end{aligned}$$

Tramite gli ulteriori cambi di variabile $\lambda = \frac{2\tilde{Z}}{r_B} r_1$ e $\Lambda = 2\lambda$, e utilizzando le *funzioni Gamma* descritte in appendice A, si ottiene che

$$\begin{aligned}
\langle \phi | \frac{1}{r_{12}} | \phi \rangle &= \frac{1}{4} \left(\frac{2\tilde{Z}}{r_B} \right)^4 \int_0^\infty d\lambda \left(\frac{r_B}{2\tilde{Z}} \right)^3 \lambda^2 e^{-\lambda} \left[\frac{2\tilde{Z}}{r_B} \frac{r_B}{2\tilde{Z}} \frac{1}{\lambda} \int_0^\lambda dx x^2 e^{-x} + \int_\lambda^\infty dx x e^{-x} \right] = \\
&= \frac{1}{4} \frac{2\tilde{Z}}{r_B} \int_0^\infty d\lambda \lambda^2 e^{-\lambda} \left[\frac{1}{\lambda} (\Gamma(3) - \Gamma(3, \lambda)) + \Gamma(2, \lambda) \right] = \\
&= \frac{\tilde{Z}}{2r_B} \int_0^\infty d\lambda \lambda^2 e^{-\lambda} \left[\frac{2}{\lambda} - \frac{2}{\lambda} e^{-\lambda} \left(1 + \lambda + \frac{\lambda^2}{2} \right) + e^{-\lambda} (1 + \lambda) \right] = \\
&= \frac{\tilde{Z}}{2r_B} \left[2 \int_0^\infty d\lambda \lambda e^{-\lambda} - \frac{1}{2} \int_0^\infty d\Lambda \Lambda e^{-\Lambda} \left(1 + \frac{\Lambda}{2} + \frac{\Lambda^2}{8} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{8} \int_0^\infty d\Lambda \Lambda^2 e^{-\Lambda} (1 + \frac{\Lambda}{2}) \right] = \\
&= \frac{\tilde{Z}}{2r_B} \left[2\Gamma(2) - \frac{1}{2} \left(\Gamma(2) + \frac{\Gamma(3)}{2} + \frac{\Gamma(4)}{8} \right) + \frac{1}{8} \left(\Gamma(3) + \frac{\Gamma(4)}{2} \right) \right] = \\
&= \frac{5}{8} \frac{\tilde{Z}}{r_B} = \frac{5}{8} \frac{\mu \tilde{Z} e^2}{\hbar^2}.
\end{aligned}$$

Combinando i risultati ottenuti ed esplicitando $\tilde{Z} = Z - \sigma$, (2.9) vale

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}[\phi(\sigma)] &= -\frac{\mu \tilde{Z}^2 e^4}{\hbar^2} - 2\sigma \frac{\mu \tilde{Z} e^4}{\hbar^2} + e^2 \frac{5}{8} \frac{\mu \tilde{Z} e^2}{\hbar^2} = \\
&= -\frac{\mu e^4}{\hbar^2} \left[(Z - \sigma)^2 + 2\sigma(Z - \sigma) - \frac{5}{8}(Z - \sigma) \right] = \\
&= -\frac{\mu e^4}{\hbar^2} \left(Z^2 - \frac{5}{8}Z - \sigma^2 + \frac{5}{8}\sigma \right).
\end{aligned}$$

Ponendo la derivata di $\mathcal{E}[\phi(\sigma)]$ rispetto a σ uguale a zero

$$\frac{d\mathcal{E}[\phi(\sigma)]}{d\sigma} = -\frac{\mu e^4}{\hbar^2} \left(-2\sigma + \frac{5}{8} \right) = 0,$$

si ricava immediatamente che il valore ottimale di σ è

$$\bar{\sigma} = \frac{5}{16}.$$

Applicando i risultati ottenuti all'atomo di elio si ottiene che, posto $Z = 2$ e dato che $\mu e^4 / \hbar^2 = 27.2 \text{ eV}$, l'energia media dello stato fondamentale è

$$\mathcal{E}[\phi(\bar{\sigma})] = -77.5 \text{ eV},$$

risultato che approssima il valore sperimentale di -79.0 eV .

2.4 Atomo muonico

Il muone è una particella fondamentale con carica elettrica $-e$, uguale a quella dell'elettrone, e massa μ , 207 volte più grande. A causa della grande differenza di massa, uno ione idrogenoide muonico ha un comportamento ed una descrizione diversi da quelli dell'atomo idrogenoide trattato precedentemente.

Invece che dall'unità di lunghezza atomica tipica, ovvero il raggio di Bohr elettronico

$$r_B = \frac{\hbar^2}{me^2} = 5.29 \cdot 10^{-9} \text{ cm},$$

l'atomo muonico è caratterizzato dal raggio di Bohr muonico

$$r_\mu = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = \frac{m}{\mu} r_B = 2.56 \cdot 10^{-11} \text{ cm},$$

più piccolo di due ordini di grandezza. Considerando il rapporto tra il raggio $R = 7.05 \cdot 10^{-13} \text{ cm}$, di un nucleo con $Z = 81$, e i raggi medi degli orbitali dei due atomi r_B/Z e r_μ/Z , si ottiene

$$\frac{R}{r_B/Z} = 1.08 \cdot 10^{-2}$$
$$\frac{R}{r_\mu/Z} = 2.23.$$

Si vede quindi che mentre il raggio medio dell'orbitale elettronico è circa 100 volte più grande del raggio del nucleo, l'orbitale muonico ha un raggio medio che è dell'ordine di grandezza di quello nucleare. Di conseguenza il muone si trova, a differenza dell'elettrone, con grande probabilità, all'interno del nucleo e il potenziale di cui risente non è quello di una carica nucleare puntiforme, bensì quello di una distribuzione di carica spaziale di dimensione finita.

Modellando il nucleo come una sfera uniformemente carica di raggio R con carica totale Ze , la densità di carica spaziale è data da

$$\rho(r) = \frac{3Ze}{4\pi R^3} \Theta(R - r), \quad (2.12)$$

dove $\Theta(x)$ è la funzione gradino di Heaviside definita come

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } x < 0 \\ 1 & \text{per } x \geq 0 \end{cases}.$$

L'energia potenziale elettrostatica assume la consueta forma coulombiana

$$U_C(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$

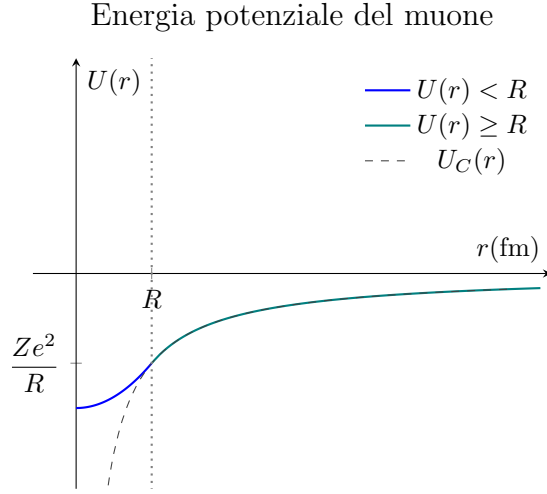


Figura 2.1: Grafico raffigurante il potenziale $U(r)$ a cui è soggetto il muone, messo a confronto con il potenziale coulombiano $U_C(r)$.

solo per $r \geq R$, come mostrato in figura 2.1, mentre è modificata per $r < R$, cosicché risulta

$$U(r) = \begin{cases} \frac{Ze^2}{2R} \left(\frac{r^2}{R^2} - 3 \right) & \text{per } r < R \\ -\frac{Ze^2}{r} & \text{per } r \geq R \end{cases}. \quad (2.13)$$

Dimostrazione. L'energia potenziale è pari al lavoro compiuto sul muone per portarlo dall'infinito a r , cambiato di segno. Dato che sul muone agisce la forza elettrostatica dovuta alla sua interazione col nucleo, l'energia potenziale del muone è

$$U(r) = - \int_{\infty}^r \frac{-e q(r')}{r'^2} dr' = - \int_r^{\infty} \frac{e q(r')}{r'^2} dr',$$

dove $q(r)$ è la carica nucleare contenuta all'interno di una sfera di raggio r . La carica $q(r)$ si calcola utilizzando la densità di carica nucleare (2.12),

$$\begin{aligned} q(r) &= \int_0^r \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \rho(r') r'^2 \sin \theta \, d\varphi \, d\theta \, dr' = \\ &= 4\pi \frac{3Ze}{4\pi R^3} \int_0^r r'^2 \Theta(R - r') dr' = \\ &= \frac{3Ze}{R^3} \left[\frac{r'^3}{3} \right]_0^{\min(r, R)} = Ze \min \left(1, \left(\frac{r}{R} \right)^3 \right). \end{aligned}$$

Nel calcolo dell'energia potenziale si sviluppano così due casi distinti. Per $r \geq R$ si ha

$$U(r) = -Ze^2 \int_r^\infty \frac{1}{r'^2} dr' = Ze^2 \left[\frac{1}{r'} \right]_r^\infty = -\frac{Ze^2}{r},$$

mentre per $r < R$ si ha

$$\begin{aligned} U(r) &= -Ze^2 \left(\int_r^R \frac{r'}{R^3} dr' + \int_R^\infty \frac{1}{r'^2} dr' \right) = \\ &= -Ze^2 \left(\frac{1}{R^3} \left[\frac{r'^2}{2} \right]_r^R - \left[\frac{1}{r'} \right]_R^\infty \right) = \\ &= \frac{Ze^2}{2R} \left(\frac{r^2}{R^2} - 3 \right), \end{aligned}$$

dimostrando (2.13). □

Volendo descrivere l'orbitale $1s$, si utilizza la funzione d'onda di prova

$$\langle \mathbf{x} | u \rangle = u(r) = \frac{C}{\sqrt{4\pi}} (1 + \alpha r) e^{-\alpha r}, \quad (2.14)$$

con armonica sferica $Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$, e si applica il metodo variazionale per calcolare l'energia dello stato fondamentale dell'atomo muonico. Innanzitutto si normalizza la funzione d'onda, ottenendo

$$C^2 = \frac{4\alpha^3}{7}. \quad (2.15)$$

Dimostrazione. Si applica la condizione di normalizzazione a (2.14)

$$\langle u | u \rangle = \int |u(r)|^2 d\mathbf{x}^3 = 1,$$

e si calcola

$$\begin{aligned} \int |u(r)|^2 d\mathbf{x}^3 &= 4\pi \int_0^\infty \frac{C^2}{4\pi} (1 + \alpha r)^2 r^2 e^{-2\alpha r} dr = \\ &= C^2 \int_0^\infty (r^2 + 2\alpha r^3 + \alpha^2 r^4) e^{-2\alpha r} dr = \\ &= C^2 \int_0^\infty \left(\frac{x^2}{4\alpha^2} + \frac{x^3}{4\alpha^2} + \frac{x^4}{16\alpha^2} \right) e^{-x} \frac{dx}{2\alpha} = \\ &= \frac{C^2}{8\alpha^3} \left(\Gamma(3) + \Gamma(4) + \frac{\Gamma(5)}{4} \right) = \frac{7C^2}{4\alpha^3}, \end{aligned}$$

da cui è immediato ottenere (2.15). □

Si calcola ora il funzionale d'energia

$$\mathcal{E}[u(\alpha)] = \langle \hat{H} \rangle = E_{kin} + E_{pot}, \quad (2.16)$$

utilizzando

$$\chi = Cr(1 + \alpha r)e^{-\alpha r}.$$

Esplicitando C da (2.15) e definendo $\lambda = 2\alpha R$, l'energia cinetica vale

$$\begin{aligned} E_{kin} &= \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty \left(\frac{d\chi(r)}{dr} \right)^2 dr = C^2 \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty [(1 + 2\alpha r)e^{-\alpha r} - \alpha(r + \alpha r^2)e^{-\alpha r}]^2 dr = \\ &= C^2 \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty (1 + \alpha r - (\alpha r)^2)^2 e^{-2\alpha r} dr = \\ &= C^2 \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty (1 + (\alpha r)^2 + (\alpha r)^4 + 2\alpha r - 2(\alpha r)^2 - 2(\alpha r)^3) e^{-2\alpha r} dr = \\ &= C^2 \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty \left(1 + x - \frac{x^2}{4} - \frac{x^3}{4} + \frac{x^4}{16} \right) e^{-x} \frac{dx}{2\alpha} = \\ &= \frac{4\alpha^3}{7} \frac{\hbar^2}{4\mu\alpha} \left[\Gamma(1) + \Gamma(2) - \frac{\Gamma(3)}{4} - \frac{\Gamma(4)}{4} + \frac{\Gamma(5)}{16} \right] = \frac{3\hbar^2}{14\mu} \alpha^2 = \frac{3\hbar^2}{56\mu R^2} \lambda^2. \end{aligned}$$

Il termine di energia potenziale invece è dato da

$$E_{pot} = \int_0^\infty U(r) \chi^2 dr = \underbrace{\frac{Ze^2}{2R} \int_0^R \left(\frac{r^2}{R^2} - 3 \right) \chi^2 dr}_{C^2 I_1} - \underbrace{Ze^2 \int_R^\infty \frac{\chi^2}{r} dr}_{C^2 I_2}. \quad (2.17)$$

Si calcolano separatamente gli integrali I_1 e I_2 utilizzando le funzioni Gamma incomplete descritte in appendice A e definendo $\lambda = 2\alpha R$.

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^R \left(\frac{r^2}{R^2} - 3 \right) (1 + \alpha r)^2 r^2 e^{-2\alpha r} dr = \\ &= \frac{1}{R^2} \int_0^R (1 + (\alpha r)^2 + 2\alpha r) r^4 e^{-2\alpha r} dr - 3 \int_0^R (1 + (\alpha r)^2 + 2\alpha r) r^2 e^{-2\alpha r} dr = \\ &= \frac{1}{R^2 (2\alpha)^5} \int_0^\lambda \left(x^4 + \frac{x^6}{4} + x^5 \right) e^{-x} dx - \frac{3}{(2\alpha)^3} \int_0^\lambda \left(x^2 + \frac{x^4}{4} + x^3 \right) e^{-x} dx = \\ &= \frac{R^3}{\lambda^5} \left[\Gamma(5) - \Gamma(5, \lambda) + \frac{\Gamma(7) - \Gamma(7, \lambda)}{4} + \Gamma(6) - \Gamma(6, \lambda) \right] - \frac{3R^3}{\lambda^3} \left[\Gamma(3) - \Gamma(3, \lambda) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\Gamma(5) - \Gamma(5, \lambda)}{4} + \Gamma(4) - \Gamma(4, \lambda) \right] = \\ &= \frac{R^3}{\lambda^5} \left[324 - 42\lambda^2 - e^{-\lambda} \left(324 + 324\lambda + 120\lambda^2 + 12\lambda^3 - \frac{15}{2}\lambda^4 - \frac{7}{2}\lambda^5 - \frac{\lambda^6}{2} \right) \right]. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_2 &= \int_R^\infty (1 + \alpha r)^2 r e^{-2\alpha r} dr = \int_R^\infty (1 + (\alpha r)^2 + 2\alpha r) r e^{-2\alpha r} dr = \\
&= \frac{1}{(2\alpha)^2} \int_\lambda^\infty \left(x + \frac{x^3}{4} + x^2 \right) e^{-x} dx = \frac{R^2}{\lambda^2} \left[\Gamma(2, \lambda) + \frac{\Gamma(4, \lambda)}{4} + \Gamma(3, \lambda) \right] = \\
&= \frac{R^2}{\lambda^2} e^{-\lambda} \left(\frac{9}{2} + \frac{9}{2}\lambda + \frac{7}{4}\lambda^2 + \frac{1}{4}\lambda^3 \right).
\end{aligned}$$

Inoltre, esprimendo C^2 rispetto a λ , che diventa $C^2 = \frac{\lambda^3}{14R^3}$, (2.17) vale

$$\begin{aligned}
E_{pot} &= \frac{Ze^2}{2R} C^2 I_1 - Ze^2 C^2 I_2 = \\
&= \frac{Ze^2}{2R} \frac{\lambda^3}{14R^3} \frac{R^3}{\lambda^5} \left[324 - 42\lambda^2 - e^{-\lambda} \left(324 + 324\lambda + 120\lambda^2 + 12\lambda^3 - \frac{15}{2}\lambda^4 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{7}{2}\lambda^5 - \frac{\lambda^6}{2} \right) \right] - Ze^2 \frac{\lambda^3}{14R^3} \frac{R^2}{\lambda^2} e^{-\lambda} \left(\frac{9}{2} + \frac{9}{2}\lambda + \frac{7}{4}\lambda^2 + \frac{1}{4}\lambda^3 \right) = \\
&= \frac{3Ze^2}{56R} \left[\frac{216}{\lambda^2} - 28 - e^{-\lambda} \left(\frac{216}{\lambda^2} + \frac{216}{\lambda} + 80 + 14\lambda + \lambda^2 \right) \right].
\end{aligned}$$

Otteniamo così la seguente espressione per il potenziale dell'energia (2.16)

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}[u(\lambda)] &= \frac{3\hbar\lambda^2}{56\mu R^2} + \frac{3Ze^2}{56R} f(\lambda) = \frac{3e^2}{56R^2} \left[\frac{\hbar^2}{\mu e^2} \lambda^2 + ZRf(\lambda) \right] = \\
&= \frac{3e^2}{56R^2} [r_\mu \lambda^2 + ZRf(\lambda)],
\end{aligned} \tag{2.18}$$

dove

$$f(\lambda) = \frac{216}{\lambda^2} - 28 - e^{-\lambda} \left(\frac{216}{\lambda^2} + \frac{216}{\lambda} + 80 + 14\lambda + \lambda^2 \right).$$

Si impone ora la condizione

$$\frac{d\mathcal{E}[u(\lambda)]}{d\lambda} = 0,$$

per minimizzare il funzionale d'energia. Calcolata la derivata di $f(\lambda)$

$$\frac{df(\lambda)}{d\lambda} = -\frac{2}{\lambda^3} \left[216 - e^{-\lambda} \left(216 + 216\lambda + 108\lambda^2 + 33\lambda^3 + 6\lambda^4 + \frac{\lambda^5}{2} \right) \right],$$

si ricava immediatamente che, posto

$$2r_\mu \lambda - \frac{2ZR}{\lambda^3} \left[216 - e^{-\lambda} \left(216 + 216\lambda + 108\lambda^2 + 33\lambda^3 + 6\lambda^4 + \frac{\lambda^5}{2} \right) \right] = 0,$$

λ è determinato dall'equazione

$$\frac{e^{-\lambda}}{\lambda^4} \left[216e^\lambda - \left(216 + 216\lambda + 108\lambda^2 + 33\lambda^3 + 6\lambda^4 + \frac{\lambda^5}{2} \right) \right] = \frac{r_\mu}{ZR}.$$

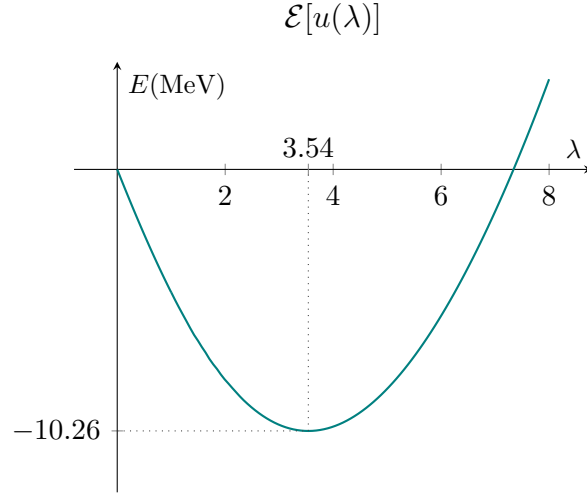


Figura 2.2: La figura mostra l'andamento dell'energia media del muone in funzione del parametro λ , mettendone in evidenza il punto di minimo.

Tramite WolframAlpha è stato calcolato il valore critico di $\bar{\lambda} \simeq 3.54$, che corrisponde ad un valore dell'energia $\mathcal{E}[u(\bar{\lambda})] \simeq -10.26$ MeV, come osservabile in figura 2.2.

2.5 Potenziale di Yukawa

Dato un potenziale di Yukawa agente tra due nucleoni

$$V(r) = -V_0 \frac{e^{-r/a}}{r/a}, \quad (2.19)$$

è possibile stimarne l'ampiezza a minima affinché esistano stati legati. Per stati con momento angolare orbitale nullo, $l = 0$, la funzione d'onda di prova adeguata è data da

$$\langle \mathbf{x} | u \rangle = u(r) = \frac{C}{\sqrt{4\pi}} e^{-\alpha r}, \quad (2.20)$$

da cui

$$\chi = C r e^{-\alpha r}.$$

Utilizzando il metodo variazionale è possibile trovare una soluzione ottimale per la ampiezza del potenziale.

Si normalizza, innanzitutto, la funzione d'onda per determinare C . Si calcola dunque

$$\begin{aligned} \langle u | u \rangle &= \int |u(r)|^2 d\mathbf{x}^3 = 4\pi \int_0^\infty \frac{C^2}{4\pi} e^{-2\alpha r} r^2 dr = \\ &= C^2 \int_0^\infty \frac{x^2}{4\alpha^2} e^{-x} \frac{dx}{2\alpha} = \frac{C^2}{8\alpha^3} \Gamma(3) = \frac{C^2}{4\alpha^3}, \end{aligned}$$

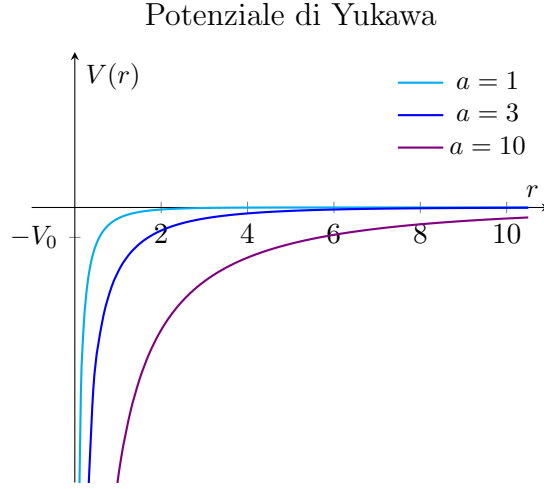


Figura 2.3: Grafico che rappresenta il potenziale di Yukawa per diversi valori di a .

e si impone

$$\langle u | u \rangle = \int |u(r)|^2 d\mathbf{x}^3 = 1,$$

ottenendo così

$$C^2 = 4\alpha^3.$$

Si procede poi con il calcolo dell'energia cinetica

$$\begin{aligned} E_{kin} &= \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty \left(\frac{d\chi}{dr} \right)^2 dr = \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty \left[\frac{d}{dr} (C r e^{-\alpha r}) \right]^2 dr = \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu} C^2 \int_0^\infty (1 - \alpha r)^2 e^{-2\alpha r} dr = \frac{\hbar^2}{2\mu} 4\alpha^3 \int_0^\infty \left(1 + \frac{x^2}{4} - x \right) e^{-x} \frac{dx}{2\alpha} = \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu} 2\alpha^2 \left(\Gamma(1) + \frac{\Gamma(3)}{4} - \Gamma(2) \right) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu}, \end{aligned}$$

e successivamente dell'energia potenziale

$$\begin{aligned} E_{pot} &= \int_0^\infty U(r) \chi(r)^2 dr = -a C^2 V_0 \int_0^\infty \frac{e^{r/a}}{r} r^2 e^{-2\alpha r} dr = \\ &= -4a\alpha^3 V_0 \int_0^\infty r e^{-(2\alpha + \frac{1}{a})r} dr = -4a\alpha^3 V_0 \int_0^\infty \frac{x}{(2\alpha + \frac{1}{a})} e^{-x} \frac{dx}{(2\alpha + \frac{1}{a})} = \\ &= -V_0 \frac{4a\alpha^3}{(2\alpha + \frac{1}{a})^2} \Gamma(2) = -V_0 \frac{4a^3 \alpha^3}{(1 + 2a\alpha)^2}, \end{aligned}$$

in cui è stato utilizzato il cambio di variabile $x = (2\alpha + \frac{1}{a})r$. L'energia media risulta quindi

$$E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu} - V_0 \frac{4a^3 \alpha^3}{(1 + 2a\alpha)^2}.$$

Introducendo le due quantità adimensionali

$$\begin{aligned} 2a\alpha &= p, \\ \frac{2\mu a^2}{\hbar^2} V_0 &= K, \end{aligned}$$

è possibile esprimere l'energia come

$$\frac{E}{V_0} = \frac{p^2}{4K} - \frac{p^3}{2(1+p)^2}, \quad (2.21)$$

rimpiazzando con p il parametro variazionale α . I parametri appena introdotti indicano rispettivamente il rapporto tra raggio del potenziale e raggio della funzione d'onda, e la profondità del potenziale. Derivando ora rispetto a p

$$\frac{dE}{dp} = \left[\frac{p}{2K} - \left(\frac{3p^2}{2(1+p)^2} - \frac{p^3}{(1+p)^3} \right) \right] V_0 = \left[\frac{p}{2K} - \frac{3p^2 + p^3}{2(1+p)^3} \right] V_0,$$

si vede facilmente che la derivata si annulla per

$$K = \frac{(1+p)^3}{p(p+3)}. \quad (2.22)$$

Inserendo questo risultato in (2.21) l'energia risulta essere

$$E = -V_0 \frac{p^3(p-1)}{4(p+1)^3},$$

da cui si deduce che, poiché p è per definizione un numero positivo, si hanno stati legati solo per $p > 1$. La condizione equivalente $K > 2$ è deducibile immediatamente da (2.22). Si ha anche una relazione tra l'ampiezza del potenziale a , che solitamente è dell'ordine della lunghezza d'onda di Compton del pione, cioè 10^{-13} cm, e l'inverso del raggio di decadimento della funzione d'onda α . Deve infatti valere

$$2a > \frac{1}{\alpha}.$$

2.6 Modello a forza centrale del deutone

Il deutone, ovvero il nucleo dell'atomo di deuterio, è costituito da un neutrone e un protone e presenta un unico stato legato possibile, di tipo $1s$. L'energia di legame misurata sperimentalmente è

$$E = -2.225 \text{ MeV}. \quad (2.23)$$

Idealizzando l'interazione tra i due nucleoni con il potenziale centrale

$$V(r) = -Ae^{-r/a}, \quad (2.24)$$

si applica il metodo variazionale per ottenere una stima dell'energia di legame del sistema.

L'autofunzione di prova che si utilizza è

$$u(r) = \frac{C}{\sqrt{4\pi}} e^{-\frac{\alpha r}{2a}}, \quad (2.25)$$

che risulta normalizzata per

$$C^2 = \frac{\alpha^3}{2a^3}. \quad (2.26)$$

Dimostrazione. Tramite il cambio di variabile $x = \frac{\alpha r}{a}$, si calcola

$$\begin{aligned} \int |u(r)|^2 d\mathbf{x}^3 &= 4\pi \int_0^\infty \frac{C^2}{4\pi} r^2 e^{-\frac{\alpha r}{a}} dr = \\ &= C^2 \int_0^\infty \frac{a^2 x^2}{\alpha^2} e^{-x} \frac{a}{\alpha} dx = \\ &= \frac{C^2 a^3}{\alpha^3} \Gamma(3) = 2 \frac{C^2 a^3}{\alpha^3}. \end{aligned}$$

Imponendo quindi la condizione di normalizzazione

$$\langle u | u \rangle = \int |u(r)|^2 d\mathbf{x}^3 = 1,$$

si trova (2.26). □

Da (2.25) utilizzando

$$\chi = C r e^{-\frac{\alpha r}{2a}},$$

si calcola il funzionale d'energia

$$\mathcal{E}[u(\alpha)] = E_{kin} + E_{pot}. \quad (2.27)$$

L'energia cinetica vale

$$E_{kin} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty \left(\frac{d\chi}{dr} \right)^2 dr = C^2 \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty \left[\frac{d}{dr} (r e^{-\frac{\alpha r}{2a}}) \right]^2 dr =$$

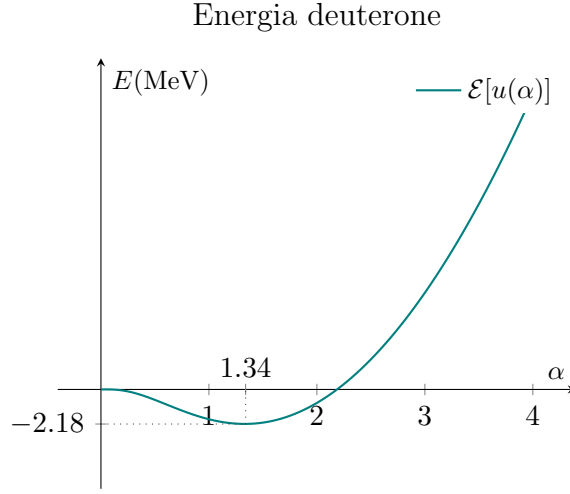


Figura 2.4: Grafico che rappresenta l'andamento dell'energia del deutone in funzione del parametro α . È evidenziato il punto di minimo.

$$\begin{aligned}
 &= C^2 \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty \left(1 - \frac{\alpha r}{2a}\right)^2 e^{-\frac{\alpha r}{a}} dr = \\
 &= \frac{\alpha^3}{2a^3} \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty \left(1 + \frac{x^2}{4} - x\right) e^{-x} \frac{a}{\alpha} dx = \\
 &= \frac{\hbar^2 \alpha^2}{4\mu a^2} \left(\Gamma(1) + \frac{\Gamma(3)}{4} - \Gamma(2)\right) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{8\mu a^2},
 \end{aligned}$$

in cui μ è la massa ridotta. L'energia potenziale si calcola utilizzando il cambio di variabile $x = r \left(\frac{1+\alpha}{a}\right)$,

$$\begin{aligned}
 E_{pot} &= \int_0^\infty V(r) \chi^2 dr = -AC^2 \int_0^\infty r^2 e^{-r(\frac{1+\alpha}{a})} dr = \\
 &= -A \frac{\alpha^3}{2a^3} \int_0^\infty \frac{a^2}{(1+\alpha)^2} x^2 e^{-x} \frac{a}{1+\alpha} dx = \\
 &= -A \frac{\alpha^3}{2(1+\alpha)^3} \Gamma(3) = -A \frac{\alpha^3}{(1+\alpha)^3}
 \end{aligned}$$

L'energia del sistema (2.27) vale quindi

$$\mathcal{E}[u(\alpha)] = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{8\mu a^2} - A \frac{\alpha^3}{(1+\alpha)^3},$$

e l'andamento è mostrato in figura 2.4. Derivando ora $\mathcal{E}[u(\alpha)]$ rispetto α e annullando la derivata

$$\frac{d\mathcal{E}[u(\alpha)]}{d\alpha} = \frac{\hbar^2 \alpha}{4\mu a^2} - 3A \left(\frac{\alpha^2}{(1+\alpha)^3} - \frac{\alpha^3}{(1+\alpha)^4} \right) = \frac{\hbar^2 \alpha}{4\mu a^2} - 3A \frac{\alpha^2}{(1+\alpha)^4} = 0,$$

si ottiene la seguente equazione

$$\frac{(1 + \alpha)^4}{\alpha} = 12 \frac{A\mu a^2}{\hbar^2},$$

per determinare il valore ottimale $\bar{\alpha}$. Utilizzando i valori sperimentali $a = 2.18 \cdot 10^{-13}$ cm, $A = 32.7$ MeV e approssimando allo stesso valore la massa dei nucleoni, per cui $\mu = 1.67 \cdot 10^{-27}$ kg, si ricava che

$$\bar{\alpha} = 1.34,$$

e l'energia risulta

$$\mathcal{E}[u(\bar{\alpha})] = -2.18 \text{ MeV},$$

prossima al risultato sperimentale (2.23).

Appendice A

Funzione Gamma di Eulero

La *funzione Gamma*, nota anche come funzione Gamma di Eulero, è un'estensione della funzione fattoriale ai numeri reali e complessi. È infatti definita su tutto il campo complesso, esclusi i numeri interi non positivi, come

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} x^{z-1} e^{-x} dx,$$

che nel caso $z = n \in \mathbb{N}$ è proprio la funzione fattoriale

$$\Gamma(n) = \int_0^{\infty} x^{n-1} e^{-x} dx = (n-1)!. \quad (\text{A.1})$$

Varianti di tale funzione, che è utile esplicitare per questa trattazione, sono le *funzioni Gamma incomplete*

$$\Gamma(z, a) = \int_a^{\infty} x^{z-1} e^{-x} dx,$$

e

$$\gamma(z, a) = \int_0^a x^{z-1} e^{-x} dx.$$

Considerando nuovamente il caso in cui $z = n \in \mathbb{N}$, le due funzioni precedenti valgono

$$\Gamma(n, a) = \int_a^{\infty} x^{n-1} e^{-x} dx = (n-1)! e^{-a} \left(1 + a + \frac{1}{2!} a^2 + \cdots + \frac{1}{(n-1)!} a^{n-1} \right), \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} \gamma(n, a) &= \int_0^a x^{n-1} e^{-x} dx = \int_0^{\infty} x^{n-1} e^{-x} dx - \int_a^{\infty} x^{n-1} e^{-x} dx = \Gamma(n) - \Gamma(n, a) = \\ &= (n-1)! \left[1 - e^{-a} \left(1 + a + \frac{1}{2!} a^2 + \cdots + \frac{1}{(n-1)!} a^{n-1} \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Bibliografia

- [1] **Bethe H. A., Salpeter E. E.** (1957). *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron*. Springer-Verlag, Berlin.
- [2] **Bransden B. H., Joachain C. J.** (1983). *Physics of Atoms and Molecules*. Longman Scientific and Technical, New York.
- [3] **Griffiths D. J.** (1995). *Introduction to Quantum Mechanics*. Upper Saddle River, New Jersey.
- [4] **Flügge S.** (1994). *Practical Quantum Mechanics*. Springer, Berlin.
- [5] **Merzbacher E.** (1970). *Quantum Mechanics 2nd Edn.* Wiley, New York.
- [6] **Messiah A.** (1968) *Quantum Mechanics*. North-Holland, Amsterdam.
- [7] **Sakurai J. J., Napolitano J.** (2010). *Modern Quantum Mechanics Cambridge*. Addison-Wesley; 2 edizione.